

СМЕЩЕНИЕ КРАЕВОЙ ДИСЛОКАЦИИ ПОД ВОЗДЕЙСТВИЕМ УДАРНОЙ ПОСЛЕКАСКАДНОЙ ВОЛНЫ

Маркидонов А.В.¹, Смирнова М.В.²

Руководитель: проф., д.ф.-м.н. Старостенков М.Д.

¹ Филиал Кузбасского государственного технического университета
в г. Новокузнецке,

² Сибирский государственный индустриальный университет,
г. Новокузнецк,

markidonov_artem@mail.ru

Методом молекулярной динамики проведено исследование динамики краевой дислокации в кристаллите никеля, подверженному воздействию ударной послекаскадной волны. Показано, что в результате данного воздействия дислокация смещается по направлению к источнику волны. Причиной данного движения является волна разгрузки, следующая за фронтом ударной волны.

В связи с техническими сложностями и дороговизной процесса получения ионных пучков мощностью от нескольких десятков до несколько сотен МэВ в имплантационной металлургии при модификации свойств конструкционных материалов используются установки, позволяющие получать пучки ионов низких и средних энергий. Но для данных диапазонов энергий пробеги ускоренных ионов не превышают несколько сотен нанометров, что не достаточно для технологического применения. Данная проблема отчасти решается благодаря наличию определенных эффектов, которые в некоторых случаях многократно увеличивает глубину воздействия падающих ионов на материал. Так, в работе [1] установлено, что изменение дислокационной и зеренной структуры алюминий-литиевого сплава в процессе облучения наблюдается по всему объему образца толщиной 1 мм. Эффект дального действия, наблюдающийся в данном случае, авторы объясняют радиационно-динамическим воздействием ударных послекаскадных волн, возникновение которых обусловлено различием между временем термализации атомных колебаний в некоторой конечной области и временем отвода из нее тепла. В результате резкого расширения такой сильно разогретой области и формируется почти сферическая ударная волна.

Известно, что наличие дислокаций определяет способность материала к пластической деформации, а их динамика лежит в основе многих важных физических свойств. Поэтому изучение на микроуровне воздействия ударных послекаскадных волн на дислокации и их динамику является вполне актуальной задачей, особенно если учитывать, что полного понимания эффекта дального действия на сегодняшний момент не существует. В связи с этим, целью настоящей работы является изучение динамики краевой

дислокации в кристалле, подверженному воздействию ударной послелекадной волны.

Исследование проводилось методом молекулярной динамики с помощью пакета МД-моделирования XMD [2]. В качестве потенциальной функции межатомного взаимодействия использовался потенциал Джонсона, рассчитанный в рамках метода погруженного атома [3]. Для создания волны, группе атомов в приграничной области расчетного блока присваивалась скорость, превышающая скорость звуковых волн, вдоль кристаллографического направления $\langle 110 \rangle$. Плотнупакованное направление было выбрано потому, что из-за наличия механизмов фокусировки энергии, сферическая волна трансформируется во фрагменты плоских волн, распространяющихся именно вдоль плотноупакованных направлений [4, 5].

Рассмотрим расчетный блок, содержащий краевую дислокацию с вектором Бюргерса $a/2\langle 110 \rangle$ и плоскостью скольжения $\{111\}$. В ГЦК решетке такая дислокация расщепляется на две энергетически более выгодные частичные дислокации. Для структурного анализа кристаллической матрицы, и выявления образующегося в данном случае дефекта упаковки, можно использовать методы, основанные на расчетах ближайшего окружения атома, в частности, метод параметра локальной центральной симметрии CS , характеризующего степень симметрии локального окружения каждого атома [6]. Проведенное исследование показало, что при генерации в расчетном блоке ударных волн наблюдается смещение расщепленной дислокации по направлению к источнику волн (см. рис. 1).

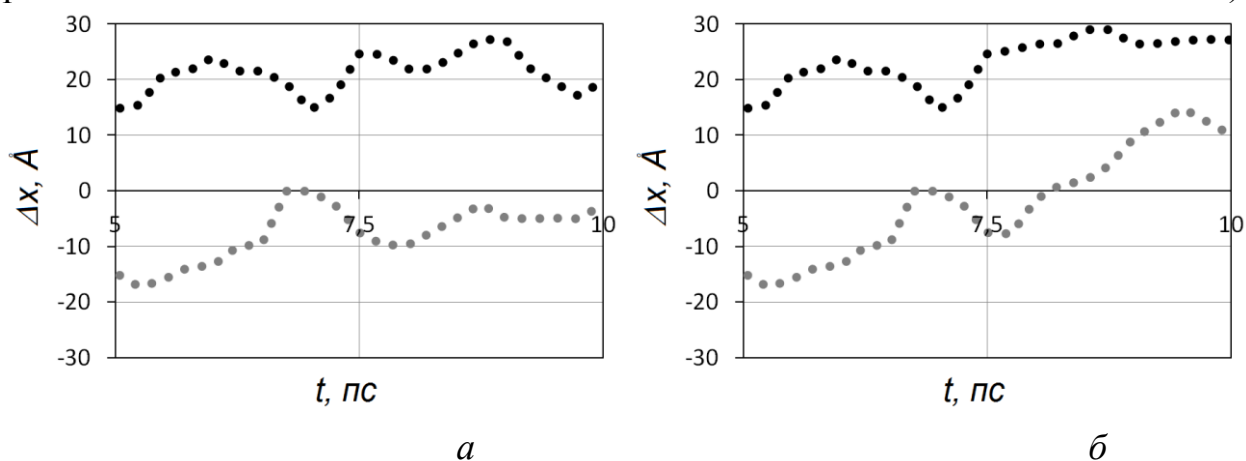


Рис.1. Изменение координат ядер частичных дислокаций относительно первоначального расположения краевой дислокации в расчетном блоке, при генерации одной (а) и двух (б) ударных волн. Температура расчетного блока 600 К

Известно, что движение дислокации определяется девиаторной компонентой тензора напряжений. Расчет напряжений при прохождении ударной волны и волны разгрузки показал следующее. Нормальное напряжение σ_x достигает максимума при прохождении через расчетную область фронта ударной волны, а касательное напряжение τ_x – при прохождении волны разгрузки. Релаксация касательных напряжений происходит в результате перемещения дислокации.

Проведенное исследование показало, что изменение дислокационной структуры облученного материала обусловлено не столько ударными послекаскадными волнами, сколько следующими за ними волнами разгрузки. Смещение дислокаций в кристалле приводит к изменению полей напряжений, что должно оказывать влияние на диффузию атомов, и, как следствие, может служить причиной радиационно-стимулированной диффузии.

Представленные положения могут найти применение при изучении проблем радиационного материаловедения.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Овчинников В.В., Ремнев Г.Е., Гусельников В.И., Гущина Н.В., Можаровский С.М., Филиппов В.А., Кайгородова Л.И. Иницируемые импульсными мощными ионными пучками изменения микроструктуры холоднодеформированного алюминий-литиевого сплава 1441 // Известия высших учебных заведений. Порошковая металлургия и функциональные покрытия. 2010. №2. С. 32-38.
2. XMD – Molecular Dynamics for Metals and Ceramics // [Electronic resource]. Mode of Access: <http://xmd.sourceforge.net/about.html>.
3. Johnson R.A. Analytic nearest-neighbor model for FCC metals // Physical Review B. 1988. V.37. №8. P.3924-3931.
4. Chudinov V.G., Cotterill R.M.J., Andreev V.V. Kinetics of the diffuse processes within a cascade region in the sub-threshold stages of F.C.C. and H.C.P. Metals // Physica Status Solidi (a). 1990. V.122. №1. P.111-120.
5. Гарбер Р.И., Федоренко А.И. Фокусировка атомных столкновений в кристаллах // Успехи физических наук. 1964. Т.83. Вып.3. С.385-432.
6. Kelchner C.L., Plimpton S.J., Hamilton J.C. Dislocation nucleation and defects structure during surface indentation // Physical Review B. 1998. V.58. 11085.

